

【研究報告】

C-9

機械学習モデルを用いたセラミックスにおける強度ばらつきと欠陥分布の関係の予測

Prediction of relationship between strength scatter and defect distribution in ceramics using a machine learning model

○前田 太陽^{*1} 長田 俊郎^{*2} 尾崎 伸吾^{*1}
MAEDA Taiyo OSADA Toshio OZAKI Shingo

ABSTRACT

Ceramics are widely used as heat-resistant structural materials, such as thermal barrier coatings for gas turbines. However, they exhibit probabilistic fracture behavior due to the size distribution of defects such as pores and grain boundaries present within them. Experimental evaluation of this strength scatter in ceramic components is both time-intensive and costly. Our previous work successfully predicted strength scatter based on fracture mechanics from microstructural information, but this approach incurs enormous computational costs for large-scale applications. In this study, we develop a deep learning-based surrogate model that predicts the Weibull distribution parameters of ceramic bending strength directly from equivalent crack length distributions, enabling substantial reductions in computational cost without sacrificing predictive accuracy. Furthermore, we develop an inverse analysis framework that couples the surrogate model with particle swarm optimization to estimate defect distributions from reference strength data. The proposed method achieves high accuracy and efficiency.

キーワード: セラミックス, 破壊統計, ワイブルプロット, 欠陥分布, 極値統計, サロゲートモデル, 機械学習
Key Words: Ceramics, Fracture statistics, Weibull plot, Defect distribution, Extreme value statistics, Surrogate model, Machine learning

1. 緒言

セラミックス材料は軽量性, 高比強度, 高耐熱性などの優れた特性を有し, 耐熱構造部材としての応用が進められている^{(1),(2)}. しかしながら, 一般にセラミックスは脆性であり, さらに製造過程で発生する欠陥(気孔, 結晶粒界, 加工傷など)は, その大きさ, 形状, 位置に分布性を持つ. このため, 同一工程で製造された部材であっても, 破壊強度には大きなばらつきが生じ, 寸法効果も顕著に現れる^{(3),(4)}. これらは構造用材料としての実用化における大きな障壁となっており, その信頼性評価には多くの時間およびコストを要する実試験が必要である.

このような課題に対し, Ozaki ら^{(5),(6)}は気孔サイズ, 気孔アスペクト比, 結晶粒径などの微視組織情報からセラミック部材の強度ばらつきを予測する数値解析手法(順解析)を開発した(詳細は第2章). 本手法は有効である一方, 試験回数に依存しない精度(例えば $N = 10,000$ 相

当)の解析結果を取得するためには, 高い計算コストを要する. したがって, 計算精度を担保しながらも計算速度を大幅に向上できる新たなモデルの開発が望まれている.

そこで本研究では, セラミックスにおける強度ばらつきと欠陥分布の関係を定量的に評価するためのモデル構築を目的とする. 具体的には, 機械学習を用いて等価き裂長さ分布から強度ばらつきを直接予測するサロゲートモデルを開発する. 近年, 材料科学分野では”Materials Informatics”の枠組みで機械学習の活用が進んでいるが, 強度設計において重要な指標である「強度ばらつき」を直接予測した研究例は限られている.

さらに, 逆解析(強度ばらつき→欠陥分布)モデルの構築は, 順解析(欠陥分布→強度ばらつき)と同様に大きな意義を有する. 高精度な逆解析は, 目標とする部材の強度ばらつき特性を満たす最適な微視組織構造の特定を可能にするため, 材料設計の高度化を強く推進する. また, 我々の先行研究では, 規格化された標準強度試験の結果から欠陥分布を逆推定し, その情報を順解析に適用することでセラミック部材の信頼性を評価するスキームを提案した⁽⁷⁾. しかしながら, 順解析と最適化アルゴ

^{*1} 横浜国立大学
〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台79-5
E-mail: maeda-taiyo-rp@ynu.jp

^{*2} 物質・材料研究機構
〒305-0047 つくば市千現1-2-1
E-mail: OSADA.Toshio@nims.go.jp

リズムを組み合わせた逆解析は計算負荷が高く、反復的な適用には制約があった。本研究では、順解析をサロゲートモデルに置き換え、粒子群最適化 (PSO) ⁽⁸⁾ と統合することで、欠陥分布の逆推定を大幅に効率化することを目指す。

2. 破壊力学に基づく順解析

2.1 曲げ解析モデル

セラミックス試験片の曲げ強度を解析するため、試験片を一辺の長さ h_e の立方体要素で離散化する (図 1)。次に、微視組織データに適合する確率分布関数に従う乱数を各要素に割り当てる。本研究では、微視組織パラメータとして等価き裂長さを採用している。各要素の等価き裂長さ a_e は線形破壊力学に基づく Griffith/Irwin 型の式 (1) により局所破壊応力 σ_t に変換される：

$$\sigma_t = \frac{K_{IC}}{\sqrt{\pi a_e}}, \quad (1)$$

ここで、 K_{IC} は破壊靱性値 (モード I) である。これにより、局所破壊応力が分布した試験片モデルが生成される。

続いて、各要素において作用する曲げ応力 σ_E が局所破壊応力 σ_t を超えるときの荷重を算出する。各要素で $\sigma_E > \sigma_t$ となる荷重を P_E とし、全要素の中で最小の P_E を対象試験片の破壊荷重 P_B とする。さらに、破壊荷重から曲げ強度が算出される。なお、荷重 P が作用したときの各要素における曲げ応力 σ_E は次式で与えられる：

$$\sigma_E = \begin{cases} \frac{Y_E(L_o - L_i)}{4I} P & \text{for } X_E < L_i/2 \\ \frac{Y_E(L_o/2 - X_E)}{2I} P & \text{for } L_i/2 \leq X_E < L_o/2 \end{cases}, \quad (2)$$

ここで、 I は断面二次モーメント、 X_E は試験片中央断面から任意の要素中心 (計算点) までの距離、 Y_E は中立面からの距離である。

上記の手順を複数の試験片モデルに適用することで得られた曲げ強度データを 2 母数ワイブル分布⁽⁹⁾により統計的に評価した。

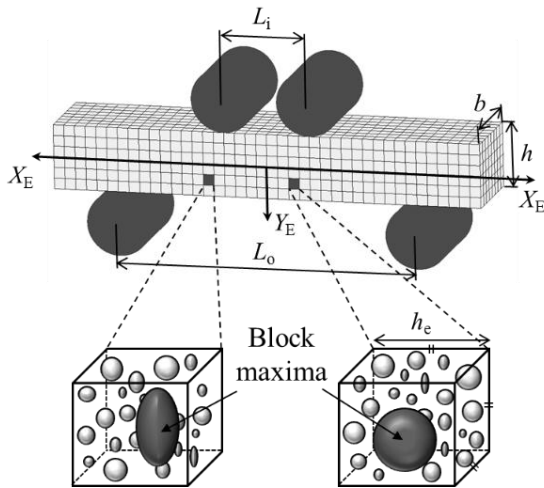


Fig. 1 Analysis model of bending test.

2.2 等価き裂長さの分布関数

本研究では、微視組織パラメータである等価き裂長さの分布を記述する確率分布関数として、一般化極値 (GEV) 分布を採用した。GEV 分布は、全データを同サイズのブロックに分割し、各ブロックの最大値のみを統計対象とする極値統計モデルである。セラミックス中には多数の欠陥が存在するが、破壊起点となる大きな欠陥のみに着目することで、効率的かつ実用的なモデリングが可能となる。本研究では、各要素がこの「ブロック」に相当する (図 1)。GEV 分布の累積分布関数は次式で与えられる：

$$G(x) = \begin{cases} \exp\left\{-\left[1 + \xi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)\right]^{-1/\xi}\right\} & \text{for } \xi \neq 0 \\ \exp\left\{-\exp\left[-\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)\right]\right\} & \text{for } \xi = 0 \end{cases}, \quad (3)$$

ここで、 μ 、 σ および ξ はそれぞれ位置、尺度および形状パラメータである。

3. 教師データの準備

3.1 生成プロセス

本研究では、曲げ試験条件として JIS R 1601 および ASTM C1161 に規格化されている 5 条件を採用した (表 1)。教師データの偏りを抑えて効率的に生成するため、Latin hypercube Sampling 法⁽¹⁰⁾に基づき、等価き裂長さ分布を記述する GEV 分布パラメータ (μ , σ , ξ) の組み合わせを試験条件ごとに 2,000 セット生成し、順解析によって対応するワイブル分布パラメータを算出した。各パラメータ範囲は、以前の研究⁽⁷⁾に基づき、 $\mu = 10 \sim 30 \mu\text{m}$ 、 $\sigma = 0 \sim 10 \mu\text{m}$ 、 $\xi = -0.5 \sim 0.5$ とした。

Table 1 Dimension of the test specimen and span length of the bending test.

Config.	b [mm]	h [mm]	L_o [mm]	L_i [mm]
3pb16			16	
3pb30			30	0
3pb40	4	3	40	
4pb3010			30	10
4pb4020			40	20

セラミックスの強度ばらつき (ワイブル分布パラメータ) は試験片本数の影響を強く受けることが知られており⁽³⁾、以前の研究⁽⁷⁾では、 $N \geq 10,000$ の場合に変動がほぼ収束することを確認している。そこで、教師データの信頼性を確保するため、本研究では順解析における試験片本数を $N = 10,000$ とした。

また、曲げ解析の要素サイズは応力分布の再現性に関係し、解析精度に影響する。Ito および著者ら^{(6),(7)}は、平滑材の曲げ解析において $h_e \leq 0.25 \text{ mm}$ の場合、強度解析結果にほとんど影響を与えないことを確認している。こ

れに基づき、本研究では $h_c = 0.25 \text{ mm}$ を採用した。対象材料は高純度アルミナ AS999 (株式会社フェローテックマテリアルテクノロジーズ, 日本) を想定し、破壊靱性値は $K_{IC} = 4.0 \text{ MPa m}^{0.5(6)}$ とした。

3.2 スクリーニングおよび前処理プロセス

前節の手順により、各試験条件で 2,000、合計 10,000 セットの教師データが生成された。しかしながら、パラメータの組み合わせによっては有限のワイブル分布パラメータが得られないケースが存在した。特に、 $0 \leq \sigma \leq 1$ かつ $-0.5 \leq \zeta \leq 0$ を同時に満たす場合に多く見られた。この範囲では等価き裂長さ分布の幅が狭く、最大値を持つため、強度ばらつきが極めて小さくなり、ワイブル係数が正の無限大に発散する。このような外れ値はモデル学習に悪影響を与える可能性があるため、事前に除外した。

外れ値除去後の教師データ数は 7,755 であった。試験条件ごとのデータ偏りを避けるため、第 3.1 節と同様のプロセスを再度行い、外れ値を除いた状態で各試験条件につき教師データ数が 2,000 となるように補充した。

次に、教師データの前処理として、全パラメータを MinMaxScaler により 0 ~ 1 の範囲に正規化した。これにより、スケールの異なるパラメータを同等に扱うことができ、モデル性能の向上が期待できる。最後に、教師データを訓練用とテスト用に分割し (比率 4:1)、前者はモデル学習および構築に、後者は未知のデータに対する汎化性能の評価に使用した。

4. サロゲートモデル

4.1 モデル構造

本研究では、順解析を高速に代替するため、人工ニューラルネットワーク構造を有する深層学習モデルをサロゲートモデルとして構築した。モデル構築には Python の機械学習ライブラリ TensorFlow⁽¹¹⁾ を使用し、ハイパーパラメータおよび構造は K 分割交差検証により決定した。隠れ層構造および学習関連パラメータを表 2 に示す。活性化関数には、隠れ層に Rectified Linear Unit (ReLU) 関数、出力層には恒等関数を適用した。損失関数には平均二乗誤差 (MSE) を使い、訓練中の予測値と真値の差を評価して学習を最適化した。また、モデル性能を多角的に検証するため、平均絶対誤差 (MAE)、相関係数 (R) および決定係数 (R^2) を評価指標として採用した。

Table 2 Configuration of the neural network architecture and training settings.

Parameters	Values
Number of hidden layers	5
Arrangement of nodes across hidden layers (Input layer to output layer)	256-128-64-32-8
Batch size	128
Maximum epoch	500
Optimizer	Adam

モデルの入力変数は、等価き裂長さ分布を表す GEV 分布パラメータ (μ, σ, ζ) に加え、曲げ試験の内および外スパン長さ (L_i, L_o) の計 5 項目とし、出力変数は強度ばらつきを表すワイブル分布パラメータ (m, β) の 2 項目とした。

4.2 モデル性能の評価

前節で決定したモデル構造を用い、ホールドアウト法によりモデル性能を評価した。訓練データのうち 20% を検証に使用した。また、学習過程での過学習を防ぐため、検証損失が 50 エポック連続で改善しない場合に訓練を終了する早期停止条件を設定した。訓練および検証における損失曲線を図 2 に示す。損失曲線は両データセットで若干の変動を伴いながらも、滑らかかつ安定して 0 に向かって収束しており、モデルが過学習することなくデータの特徴を効果的に学習したことを示している。

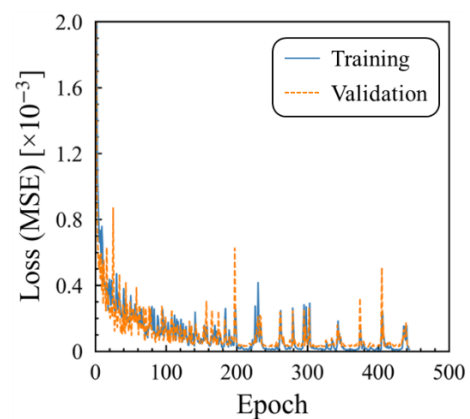


Fig. 2 Training and validation loss curves.

さらに、テスト用データセットを用いて予測性能を評価した。図 3(a) および図 3(b) には、訓練用およびテスト用データセットにおけるワイブル係数と尺度パラメータの実測値と予測値の相関図を示す。両パラメータとも高い予測精度を示し、ほぼすべての予測値が $\pm 10\%$ の相対誤差範囲内に収まった。特に、セラミックスの典型的な範囲である $m = 5 \sim 20$ および $\beta = 200 \sim 600 \text{ MPa}$ において優れた予測精度が得られた点は注目に値する。

加えて、サロゲートモデルの開発により計算時間が大幅に短縮された。例えば、3pb16 条件で試験片本数 $N = 10,000$ の順解析を実施した場合、破壊力学に基づくモデル (第 2 章) では約 208 秒を要したのに対し、本サロゲートモデルではわずか 1.0 秒で完了した。この利点はスパン長さが大きい試験条件下でより顕著となる。破壊力学に基づくモデルでは有限要素数の増加により計算コストが上昇する一方、サロゲートモデルでは試験条件に依存せず計算時間が一定である。なお、計算はすべて以下の環境で行われた: Intel Core i7-14700KF CPU, 32 GB RAM, Windows 11, Python 3.12.3 (Anaconda distribution)。この計算効率の向上は、反復的な計算を必要とする解析において特に有効であり、パラメトリックスタディや逆

解析（第5章）において大きな効果を発揮する。

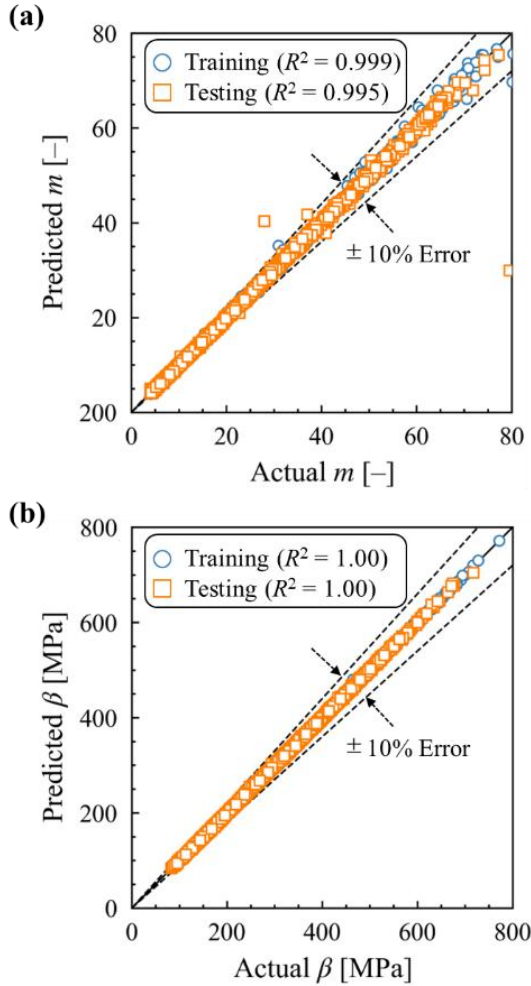


Fig. 3 Correlation between actual and predicted Weibull distribution parameters for training and testing datasets: (a) Weibull modulus; (b) scale parameter.

5. サロゲートモデルと粒子群最適化を組み合わせた逆解析モデル

順サロゲートモデルの入出力変数を入れ替えて、出力値から入力値を直接予測することは一般的に困難である。これは、逆問題が非一意性を有しており、複数の異なる入力変数の組み合わせが類似した出力値を生成し得るためである。この問題は著者らの先行研究⁽⁷⁾でも指摘しており、複数の異なる等価き裂長さ分布が同一の強度ばらつき特性を再現できることを確認している。

本課題を克服するため、本研究では、順解析用サロゲートモデルと粒子群最適化 (PSO)⁽⁸⁾を組み合わせた逆解析フレームワークを構築した。本手法は、先行研究⁽⁷⁾で提案した方法論に基づくものであり、実験的に得られた強度分布を高精度に再現可能な入力変数（等価き裂長さ分布）を推定することを目的としている。

5.1 モデル構築

図4にサロゲートモデルとPSOを統合した逆解析モ

デルのフローチャートを示す。本フレームワークでは、まず Latin hypercube sampling 法⁽¹⁰⁾により、探索空間内に解候補となる入力パラメータ（等価き裂長さ分布の GEV 分布パラメータ）が付与された粒子を生成する。次に、各粒子のパラメータをサロゲートモデルに入力し、対応する強度ばらつき（ワイブル分布パラメータ）を予測する。これらの予測値を参照試験から得られた強度特性と比較し、目的関数を用いて粒子の適合度を評価する。本研究では、先行研究⁽⁷⁾を参考に、以下の目的関数 (Error) を採用した：

$$Error = \sum_{i=1}^{n_{ref}} \left\{ \left(\frac{\ln \sigma_{Exp}^{0.007\%} - \ln \sigma_{Sim}^{0.007\%}}{\ln \sigma_{Exp}^{0.007\%}} \right)^2 + \left(\frac{\ln \sigma_{Exp}^{99.99\%} - \ln \sigma_{Sim}^{99.99\%}}{\ln \sigma_{Exp}^{99.99\%}} \right)^2 \right\}, \quad (4)$$

ここで、 $\sigma^{0.007\%}$ および $\sigma^{99.99\%}$ は、それぞれ累積破壊確率 0.007%、99.99%における強度を表し、試験片本数 $N = 10,000$ における最小および最大強度に相当する。これらの値は、ワイブル分布パラメータから算出される。なお、添え字"Exp"および"Sim"は、それぞれ実験および解析から得られた値を示す。また、 n_{ref} は参照試験の条件数に対応する。

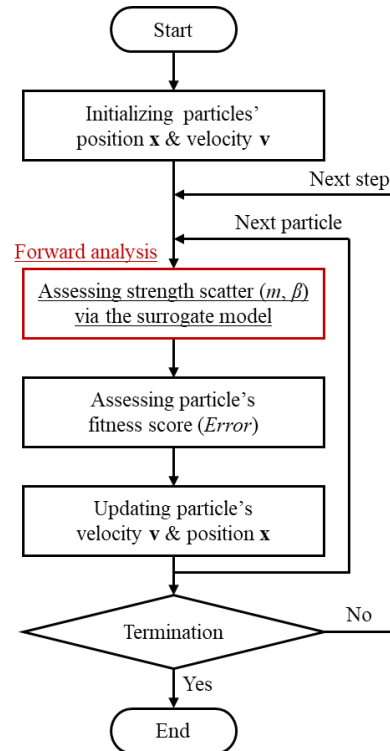


Fig. 4 Flowchart of the inverse model integrating the surrogate model with PSO.

適合度に基づき、各粒子の速度および位置を更新し、Errorが最小化される方向へ探索を行う。ステップ(t+1)に

おける速度 $\mathbf{v}^{t+1}$ および位置 $\mathbf{x}^{t+1}$ は次式で与えられる⁽⁸⁾：

$$\mathbf{v}^{t+1} = w\mathbf{v}^t + c_1 r_1^t (\mathbf{p}^t - \mathbf{x}^t) + c_2 r_2^t (\mathbf{g}^t - \mathbf{x}^t), \quad (5)$$

$$\mathbf{x}^{t+1} = \mathbf{x}^t + \mathbf{v}^{t+1}, \quad (6)$$

ここで、 w は慣性重みであり、前ステップにおける速度の影響を表す。また、 c_1 および c_2 はそれぞれ各粒子の最良位置 $\mathbf{p}^t$ および全粒子の最良位置 $\mathbf{g}^t$ に関する係数である。 r_1 および r_2 は 0~1 の範囲における一様乱数である。

この反復計算は、所定の反復回数に達するまで継続される。GEV 分布パラメータの探索範囲は、サロゲートモデル構築時と同一であり、 $\mu = 10 \sim 30 \mu\text{m}$ 、 $\sigma = 0 \sim 10 \mu\text{m}$ 、 $\xi = -0.5 \sim 0.5$ とした。PSO パラメータは先行研究⁽⁷⁾と同じ値を採用し、表 3 に示す。

Table 3 Parameters for PSO.	
Parameters	Values
Particle population	200
Maximum iteration	50
Inertia weight w	0.5
Cognitive coefficient c_1	0.5
Social coefficient c_2	0.5

5.2 等価き裂長さ分布の推定結果

逆解析モデルの妥当性を検証するため、3pb16、3pb30 および 4pb3010 の 3 種類の曲げ試験（図 6）を参照試験として選択した（ $n_{\text{ref}}=3$ ）。ここで、有効体積の異なる試験条件を参照試験に採用することで、推定される欠陥分布の正確性が向上することが先行研究⁽⁷⁾により報告されている。逆解析モデルにより推定された等価き裂長さ分布および同材料の微視組織観察結果（気孔サイズ、気孔アスペクト比および結晶粒径）⁽⁶⁾から変換された等価き裂長さデータを図 5 に示す。推定された分布は組織観察に基づくデータと良好に一致しており、本提案手法の有効性が確認された。

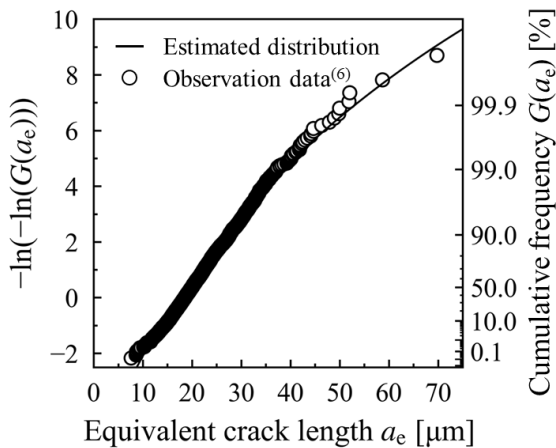


Fig. 5 Equivalent crack length distributions obtained from an inverse estimation and microstructural observation⁽⁶⁾.

さらに、推定分布の信頼性を評価するため、得られた等価き裂長さ分布（図 5）をサロゲートモデルに入力し、強度試験結果と比較した。3pb16、3pb30 および 4pb3010 における実験結果（ $N=30$ ）⁽⁶⁾およびサロゲートモデルによる予測値のワイブルプロットを図 6 に示す。予測値はすべての試験条件において実験値の 90%信頼区間内に収まっており、強度ばらつき特性を良好に再現していることが確認された。

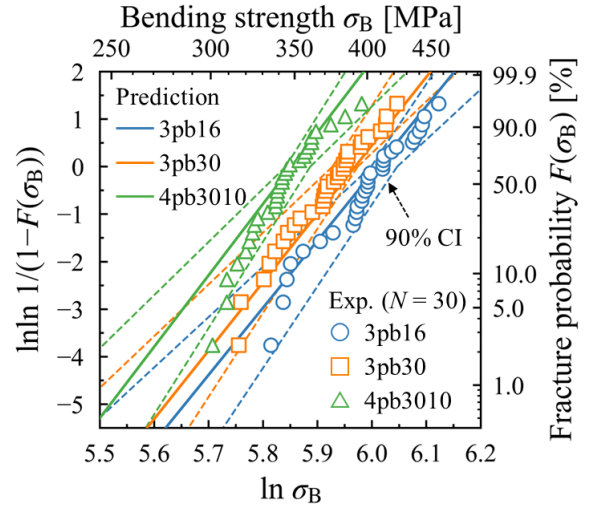


Fig. 6 Comparison of Weibull plots between experimental⁽⁶⁾ and predicted results under 3pb16, 3pb30, and 4pb3010 using the estimated equivalent crack length distribution. Dashed lines represent the 90% confidence interval of experimental results based on the maximum likelihood estimation of the Weibull distribution.

6. 結言

本研究では、機械学習を用いて、等価き裂長さ分布からセラミックスの強度ばらつき（ワイブル分布パラメータ）を直接予測するサロゲートモデルを開発した。本モデルは、従来の破壊力学に基づく順解析と比較して計算コストを大幅に削減できるとともに、高精度な予測性能を有することが確認された。さらに、サロゲートモデルと PSO を組み合わせた逆解析モデルを構築し、市販アルミナ AS999 を対象に参照試験データから等価き裂長さ分布を推定した結果、推定分布は組織観察結果と非常に一致を示した。これにより、本研究で構築した順解析および逆解析モデルを用いることで、解析精度を担保しながらも効率的に強度ばらつきと欠陥分布の関係を評価し、セラミックス材料開発の加速が期待される。

一方、本サロゲートモデルは破壊靱性値を入力変数に含めないため、単一の破壊靱性値を有するセラミックスにのみ適用可能である。異なる破壊靱性値を有する材料に対応するには、新たにサロゲートモデルを構築する必要がある、より実用的なモデル開発に向けて破壊靱性値

を入力変数に組み込む拡張が不可欠である。また、逆解析モデルで使用する最適化アルゴリズムについても改良の余地がある。本研究で採用した PSO では、過去の探索過程に関する経験が保持されないため、各逆解析の実行ごとに同等の計算時間を要する。今後は、蓄積された経験を活用可能な最適化アルゴリズム（例えば強化学習）の導入により、逆解析の計算効率をさらに向上できると考えられる。

参 考 文 献

- (1) Wu, S., Zhao, Y., Li, W., Liu, W., Wu, Y., Liu, F., Research progresses on ceramic materials of thermal barrier coatings on gas turbine, *Coatings*, Vol. 11, No. 1 (2021), 79.
- (2) Karadimas, G., Salonitis, K., Ceramic matrix composites for aero engine applications—a review, *Appl. Sci.*, Vol. 13, No. 5 (2023), 3017.
- (3) Danzer, R., Lube, T., Supancic, P., Damani, R., Fracture of ceramics, *Adv. Eng. Mater.*, Vol. 10, No. 4 (2008), pp. 275-298.
- (4) Padture, NP., Environmental degradation of high-temperature protective coatings for ceramic-matrix composites in gas-turbine engines, *Npj Mater. Degrad.*, Vol. 3, No. 1 (2019), 11.
- (5) Ozaki, S., Aoki, Y., Osada, T., Takeo, K., Nakao, W., Finite element analysis of fracture statistics of ceramics: Effects of grain size and pore size distributions, *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol. 101, No. 7 (2018), pp. 3191-3204.
- (6) Ito, C., Maeda, T., Higashi, R., Osada, T., Kohata, T., Ozaki, S., Application of extreme value statistics to internal pore distribution in ceramics and prediction of size dependency of strength scatter, *J. Eur. Ceram. Soc.*, Vol. 44, No. 5 (2024), pp. 3381-3392.
- (7) Maeda, T., Osada, T., Ozaki, S., Reliability evaluation scheme for ceramics based on defect size distribution inversely estimated from standardized tests, *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol. 108, No. 9 (2025), e20660.
- (8) Eberhart, R., Kennedy, J., Particle swarm optimization, In: *Proc. IEEE Int. Conf. Neural Netw.*, (1995), pp. 1942-1948.
- (9) Weibull, W., A statistical distribution function of wide applicability, *J. Appl. Mech.*, Vol. 18, No. 3 (1951), pp. 293-297.
- (10) Helton, JC., Davis, FJ., Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems, *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, Vol. 81, No. 1 (2003), pp. 23-69.
- (11) Abadi, M., Barham, P., Chen, J., Chen, Z., Davis, A., Dean, J., Devin, M., Ghemawat, S., Irving, G., Isard, M., Kudlur, M., Levenberg, J., Monga, R., Moore, S., Murray, GD., Steiner, B., Tucker, P., Vasudevan, V., Warden, P., Wicke, M., Yu, Y., Zheng, X., TensorFlow: a system for large-scale machine learning, In: *Proc. OSDI'16*, (2016), pp. 265-283.